

Hands-on: Estrutura eletrônica e Magnetismo

Professores:

- Dr. [Ramon Cardias](#)
- Dr. [Flaviano José dos Santos](#)

Dias:

- 2 a 6 de março de 2026
- Na tarde do dia 6, os participantes deste curso irão apresentar o que aprenderam no decorrer do evento.

Informações gerais:

Neste curso vamos introduzir conceitos básicos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) aplicados a sistemas moleculares e de estado sólido. Partindo de uma revisão do problema eletrônico de muitos corpos, apresentaremos os teoremas de Hohenberg–Kohn e o formalismo de Kohn–Sham, que são os aspectos mais fundamentais da DFT. Discutiremos também as aproximações de troca–correlação mais usadas na prática: a aproximação da densidade local (LDA) e a aproximação do gradiente generalizado (GGA). Além da fundamentação teórica, apresentaremos um hands-on no qual os participantes terão contato com o fluxo completo de um cálculo de DFT: preparação de arquivos de entrada, escolha de funcionais e de bases/pseudopotenciais, critérios de convergência e análise de resultados. Por fim, faremos uma introdução à formulação de hamiltonianas de spin (modelo de Heisenberg), à equação de Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) e a conceitos básicos de dinâmica de spin, conectando cálculos de estrutura eletrônica com modelos efetivos magnéticos. Espera-se que, ao final do minicurso, o participante seja capaz de acompanhar e executar cálculos simples de DFT e compreender, em nível introdutório, como esses resultados alimentam descrições atomísticas da dinâmica de spin.

Conteúdo programático:

1. Revisão do problema eletrônico de muitos corpos e motivação para o uso de DFT
2. Teoremas de Hohenberg–Kohn e formalismo de Kohn–Sham
3. Funcionais de troca–correlação em nível introdutório: LDA e GGA
4. Aspectos práticos: funções de base, pseudopotenciais, parâmetros de cálculo e convergência
5. Introdução à hamiltoniana de spin, equação de Landau–Lifshitz–Gilbert e conceitos básicos de dinâmica de spin atomística

Referências:

- W. Koch, M. C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd ed., Wiley-VCH (2001).
- D. S. Sholl, J. A. Steckel, *Density Functional Theory: A Practical Introduction*, Wiley (2009).
- Preprint disponível em: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0211443>
- Artigos diversos sobre os tópicos da ementa